```
data_lach6

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NEt4)3H[SiW10O36(H2C=CHCH2PO)2]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C34 H77 N5 O38 P2 Si W10'
_chemical_formula_weight          3092.54

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'C2/c'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, y, -z+1/2'
 'x+1/2, y+1/2, z'
 '-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
 '-x, -y, -z'
 'x, -y, z-1/2'
 '-x+1/2, -y+1/2, -z'
 'x+1/2, -y+1/2, z-1/2'

_cell_length_a                    24.479(5)
_cell_length_b                    10.829(2)
_cell_length_c                    27.308(5)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  94.51(2)
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      7216(2)
_cell_formula_units_Z             4
_cell_measurement_temperature     293(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       3.3
_cell_measurement_theta_max       70.0

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.05
```

```
_exptl_crystal_size_mid           0.05
_exptl_crystal_size_min           0.04
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.847
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              5616
_exptl_absorpt_coefficient_mu     29.892
_exptl_absorpt_correction_type    empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min   0.3164
_exptl_absorpt_correction_T_max   0.3810
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       293(2)
_diffrn_radiation_wavelength      1.54178
_diffrn_radiation_type            CuK\a
_diffrn_radiation_source          'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method        'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             18331
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0781
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0781
_diffrn_reflns_limit_h_min        -29
_diffrn_reflns_limit_h_max        29
_diffrn_reflns_limit_k_min        -13
_diffrn_reflns_limit_k_max        13
_diffrn_reflns_limit_l_min        -33
_diffrn_reflns_limit_l_max        32
_diffrn_reflns_theta_min          3.25
_diffrn_reflns_theta_max          70.00
_reflns_number_total              6479
_reflns_number_gt                 5048
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        SMART
_computing_cell_refinement        SAINTPLUS
_computing_data_reduction         SAINTPLUS
_computing_structure_solution     SHELXTL
_computing_structure_refinement   'SHELXTL-97 (Shelrick, 1997)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;
```

```
_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0255P)^2^+1452.3387P] where P=(Fo^2^+2Fc^
2^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          6479
_refine_ls_number_parameters      430
_refine_ls_number_restraints      273
_refine_ls_R_factor_all           0.0977
_refine_ls_R_factor_gt            0.0743
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1816
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1701
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.135
_refine_ls_restrained_S_all       1.115
_refine_ls_shift/su_max           0.001
_refine_ls_shift/su_mean          0.000

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.4746(12) 0.133(2) 0.8863(9) 0.033(5) Uani 1 1 d U . .
H1A H 0.5051 0.1903 0.8899 0.040 Uiso 1 1 calc R . .
H1B H 0.4414 0.1807 0.8792 0.040 Uiso 1 1 calc R . .
C2 C 0.4709(16) 0.065(3) 0.9333(10) 0.055(8) Uani 1 1 d U . .
H2 H 0.5016 0.0206 0.9455 0.066 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.429(2) 0.062(4) 0.9583(16) 0.094(15) Uani 1 1 d U . .
H3A H 0.3973 0.1055 0.9473 0.113 Uiso 1 1 calc R . .
H3B H 0.4296 0.0176 0.9874 0.113 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 0.2516(12) 0.693(3) 0.8247(14) 0.059(8) Uani 1 1 d U . .
H4A H 0.2804 0.6997 0.8511 0.071 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.2672 0.6535 0.7971 0.071 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.2335(14) 0.822(3) 0.8094(15) 0.068(10) Uani 1 1 d U . .
H5A H 0.2644 0.8679 0.7994 0.102 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H 0.2187 0.8632 0.8365 0.102 Uiso 1 1 calc R . .
H5C H 0.2059 0.8172 0.7824 0.102 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.1918(19) 0.659(3) 0.8926(13) 0.086(11) Uani 1 1 d DU . .
H6A H 0.2255 0.6669 0.9135 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
H6B H 0.1758 0.7404 0.8886 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
C7 C 0.1530(15) 0.578(3) 0.9183(12) 0.069(10) Uani 1 1 d DU . .
H7A H 0.1469 0.6134 0.9497 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
H7B H 0.1686 0.4973 0.9229 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
H7C H 0.1188 0.5724 0.8987 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
C8 C 0.2265(13) 0.481(3) 0.8478(16) 0.071(8) Uani 1 1 d DU . .
H8A H 0.1972 0.4307 0.8590 0.085 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.2342 0.4509 0.8156 0.085 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.2752(14) 0.462(4) 0.8812(17) 0.091(14) Uani 1 1 d DU . .
H9A H 0.2847 0.3759 0.8817 0.137 Uiso 1 1 calc R . .
```

H9B H 0.2679 0.4878 0.9136 0.137 Uiso 1 1 calc R . .
H9C H 0.3050 0.5093 0.8702 0.137 Uiso 1 1 calc R . .
C10 C 0.1551(12) 0.603(4) 0.8091(14) 0.070(8) Uani 1 1 d U . .
H10A H 0.1363 0.6820 0.8102 0.084 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.1315 0.5416 0.8223 0.084 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.161(2) 0.573(4) 0.7565(14) 0.086(13) Uani 1 1 d U . .
H11A H 0.1251 0.5690 0.7392 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.1786 0.4941 0.7544 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
H11C H 0.1822 0.6352 0.7421 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.520(3) 0.616(5) 0.527(2) 0.053(13) Uani 0.51(3) 1 d PDU . .
H12A H 0.4904 0.6743 0.5278 0.063 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
H12B H 0.5328 0.5952 0.5604 0.063 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
C12A C 0.530(3) 0.583(6) 0.469(2) 0.057(11) Uani 0.49(3) 1 d PDU . .
H12C H 0.5055 0.6046 0.4409 0.068 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
H12D H 0.5596 0.5346 0.4566 0.068 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
C13 C 0.567(3) 0.677(7) 0.503(3) 0.07(2) Uani 0.51(3) 1 d PDU . .
H13A H 0.5791 0.7481 0.5213 0.103 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
H13B H 0.5542 0.7015 0.4699 0.103 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
H13C H 0.5965 0.6194 0.5013 0.103 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
C13A C 0.556(4) 0.705(7) 0.490(3) 0.059(19) Uani 0.49(3) 1 d PDU . .
H13D H 0.5731 0.7486 0.4645 0.089 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
H13E H 0.5833 0.6868 0.5163 0.089 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
H13F H 0.5281 0.7563 0.5022 0.089 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
C14 C 0.449(2) 0.580(5) 0.509(2) 0.057(12) Uani 0.51(3) 1 d PDU . .
H14A H 0.4317 0.5462 0.5369 0.068 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
H14B H 0.4610 0.6629 0.5178 0.068 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
C14A C 0.474(3) 0.534(6) 0.450(2) 0.057(11) Uani 0.49(3) 1 d PDU . .
H14C H 0.4679 0.4588 0.4307 0.068 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
H14D H 0.4999 0.5843 0.4331 0.068 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
C15 C 0.405(3) 0.590(8) 0.465(3) 0.065(17) Uani 0.51(3) 1 d PDU . .
H15A H 0.3744 0.6383 0.4750 0.097 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
H15B H 0.3919 0.5086 0.4561 0.097 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
H15C H 0.4201 0.6285 0.4381 0.097 Uiso 0.51(3) 1 calc PR . .
C15A C 0.420(3) 0.604(9) 0.451(3) 0.071(19) Uani 0.49(3) 1 d PDU . .
H15D H 0.4056 0.6226 0.4178 0.107 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
H15E H 0.4258 0.6799 0.4688 0.107 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
H15F H 0.3938 0.5543 0.4665 0.107 Uiso 0.49(3) 1 calc PR . .
N1 N 0.2057(8) 0.611(2) 0.8419(8) 0.042(5) Uani 1 1 d DU . .
N2 N 0.5000 0.5000 0.5000 0.048(7) Uani 1 2 d SDU . .
O1 O 0.4918(5) -0.2407(13) 0.7991(5) 0.018(2) Uani 1 1 d U . .
O2 O 0.4764(6) -0.2249(15) 0.8892(5) 0.028(3) Uani 1 1 d U . .
O3 O 0.3652(7) -0.2088(17) 0.8787(6) 0.037(4) Uani 1 1 d U . .
O4 O 0.3780(6) -0.2286(13) 0.7787(6) 0.023(3) Uani 1 1 d U . .
O5 O 0.6057(6) -0.2241(14) 0.8215(5) 0.021(3) Uani 1 1 d U . .
O6 O 0.5855(7) -0.2036(15) 0.9197(6) 0.032(3) Uani 1 1 d U . .
O7 O 0.4466(6) -0.4062(12) 0.7394(5) 0.019(2) Uani 1 1 d U . .
O8 O 0.4168(6) -0.4054(14) 0.8387(5) 0.023(3) Uani 1 1 d U . .
O9 O 0.2898(6) -0.2878(15) 0.7075(6) 0.030(3) Uani 1 1 d U . .
O10 O 0.3482(6) -0.4625(14) 0.7658(6) 0.026(3) Uani 1 1 d U . .
O11 O 0.3633(6) -0.4613(13) 0.6757(5) 0.025(3) Uani 1 1 d U . .
O12 O 0.5488(6) -0.4005(14) 0.8646(5) 0.025(3) Uani 1 1 d U . .
O13 O 0.4905(7) -0.5665(13) 0.8118(6) 0.026(3) Uani 1 1 d U . .
O14 O 0.3840(6) -0.6532(14) 0.8283(6) 0.027(3) Uani 1 1 d U . .
O15 O 0.4168(6) -0.6295(14) 0.7329(5) 0.025(3) Uani 1 1 d U . .
O16 O 0.5816(7) -0.6471(14) 0.8695(6) 0.029(3) Uani 1 1 d U . .
O17 O 0.4326(6) -0.0543(14) 0.8304(6) 0.029(3) Uani 1 1 d U . .
O18 O 0.5350(6) -0.0481(14) 0.8505(6) 0.030(3) Uani 1 1 d U . .
O19 O 0.4904(11) 0.113(2) 0.7919(7) 0.064(6) Uani 1 1 d U . .
Si1 Si 0.5000 -0.3197(7) 0.7500 0.0105(13) Uani 1 2 d SU . .
P1 P 0.4838(3) 0.0307(5) 0.8359(2) 0.0263(12) Uani 1 1 d U . .
W1 W 0.41604(4) -0.23125(9) 0.84044(4) 0.0215(2) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.35671(4) -0.32866(10) 0.72103(4) 0.0219(2) Uani 1 1 d U . .
W3 W 0.54887(4) -0.22779(9) 0.86601(4) 0.0212(2) Uani 1 1 d U . .
W4 W 0.41320(4) -0.54550(9) 0.79401(4) 0.0230(2) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.56552(4) -0.54342(9) 0.82515(4) 0.0229(2) Uani 1 1 d U . .
C16 C 0.244(3) 1.026(8) 0.941(4) 0.20(3) Uiso 1 1 d DU . .

```
C17 C 0.222(4) 0.927(10) 0.975(4) 0.31(6) Uiso 1 1 d DU . .
H17A H 0.1840 0.9456 0.9801 0.463 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.2428 0.9289 1.0065 0.463 Uiso 1 1 calc R . .
H17C H 0.2241 0.8471 0.9609 0.463 Uiso 1 1 calc R . .
N3 N 0.272(5) 1.079(10) 0.915(5) 0.39(8) Uiso 1 1 d DU . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
C1 0.049(15) 0.013(9) 0.038(9) 0.002(6) 0.000(10) -0.002(8)
C2 0.10(2) 0.033(15) 0.037(10) 0.001(10) 0.023(16) -0.005(17)
C3 0.11(3) 0.09(3) 0.09(3) 0.01(2) 0.05(3) -0.03(3)
C4 0.028(13) 0.051(14) 0.10(2) -0.003(16) 0.004(13) -0.002(11)
C5 0.05(2) 0.050(14) 0.11(3) -0.004(17) 0.02(2) 0.011(14)
C6 0.12(4) 0.07(2) 0.074(16) -0.015(18) 0.029(15) -0.02(2)
C7 0.07(2) 0.07(2) 0.07(2) -0.015(17) 0.019(17) 0.004(18)
C8 0.037(15) 0.053(11) 0.13(3) 0.004(15) 0.024(15) 0.001(12)
C9 0.046(19) 0.09(3) 0.14(4) 0.03(3) 0.027(17) 0.04(2)
C10 0.022(11) 0.10(2) 0.090(16) -0.005(18) 0.005(11) -0.006(12)
C11 0.12(4) 0.06(2) 0.067(15) 0.010(18) -0.024(18) -0.03(2)
C12 0.07(3) 0.03(2) 0.06(2) -0.01(2) 0.01(2) -0.02(3)
C12A 0.06(2) 0.06(2) 0.05(2) 0.010(17) -0.008(17) -0.013(19)
C13 0.08(4) 0.07(4) 0.05(4) 0.02(3) 0.00(3) -0.03(3)
C13A 0.06(3) 0.06(3) 0.05(4) 0.02(3) 0.00(3) -0.02(3)
C14 0.07(2) 0.04(3) 0.06(2) 0.00(3) 0.003(18) -0.01(2)
C14A 0.06(2) 0.06(3) 0.043(16) 0.018(18) 0.003(16) -0.032(19)
C15 0.06(3) 0.06(3) 0.07(4) 0.03(3) 0.00(3) -0.03(2)
C15A 0.09(4) 0.07(4) 0.05(4) 0.04(3) 0.01(3) -0.01(3)
N1 0.014(9) 0.043(10) 0.070(12) -0.017(10) 0.004(8) 0.005(8)
N2 0.08(2) 0.032(16) 0.035(15) -0.010(12) -0.003(14) -0.012(12)
O1 0.013(5) 0.020(6) 0.019(5) -0.001(4) 0.004(4) -0.004(5)
O2 0.027(5) 0.036(7) 0.021(6) -0.005(5) 0.006(4) 0.000(6)
O3 0.029(7) 0.044(9) 0.041(8) -0.013(8) 0.013(6) -0.004(7)
O4 0.015(6) 0.015(6) 0.039(6) -0.002(5) 0.005(5) 0.001(5)
O5 0.015(6) 0.024(7) 0.024(6) 0.002(6) -0.003(5) -0.005(6)
O6 0.034(7) 0.038(8) 0.025(6) -0.007(6) 0.001(5) 0.011(7)
O7 0.023(5) 0.012(5) 0.024(6) -0.001(4) 0.003(5) 0.000(4)
O8 0.023(7) 0.024(5) 0.024(6) 0.005(4) 0.008(5) -0.001(5)
O9 0.021(6) 0.035(8) 0.036(8) -0.003(6) 0.005(6) -0.008(6)
O10 0.026(6) 0.021(6) 0.030(6) -0.003(5) 0.004(5) -0.003(5)
O11 0.030(8) 0.015(7) 0.031(7) 0.001(5) 0.000(6) -0.010(6)
O12 0.028(8) 0.027(5) 0.019(7) 0.005(4) 0.002(6) -0.001(5)
O13 0.029(5) 0.018(7) 0.031(7) -0.001(5) 0.012(5) 0.002(5)
O14 0.021(6) 0.023(5) 0.037(6) 0.006(5) 0.011(5) 0.006(5)
O15 0.025(3) 0.024(3) 0.025(3) 0.0001(10) 0.0021(10) 0.0000(10)
O16 0.030(8) 0.025(7) 0.035(8) 0.012(6) 0.011(6) -0.008(7)
O17 0.016(6) 0.017(5) 0.054(10) -0.010(5) -0.003(6) 0.005(5)
O18 0.019(6) 0.020(5) 0.050(9) -0.007(5) -0.005(6) -0.005(5)
O19 0.100(17) 0.052(12) 0.043(9) 0.020(8) 0.015(11) 0.003(10)
Si1 0.0106(16) 0.0108(15) 0.0103(15) 0.000 0.0018(9) 0.000
P1 0.029(3) 0.021(3) 0.029(3) 0.000(2) 0.004(2) 0.002(2)
W1 0.0167(5) 0.0208(5) 0.0275(5) -0.0033(4) 0.0054(4) 0.0009(4)
W2 0.0123(5) 0.0230(5) 0.0303(5) -0.0008(4) 0.0016(4) -0.0015(4)
W3 0.0187(5) 0.0211(5) 0.0235(5) -0.0021(4) 0.0003(4) 0.0018(4)
W4 0.0220(5) 0.0173(5) 0.0304(5) 0.0023(4) 0.0068(4) -0.0043(4)
W5 0.0224(5) 0.0177(5) 0.0290(5) 0.0057(4) 0.0043(4) 0.0056(4)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
```

```
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.49(4) . ?
C1 P1 1.80(2) . ?
C1 H1A 0.9700 . ?
C1 H1B 0.9700 . ?
C2 C3 1.28(5) . ?
C2 H2 0.9300 . ?
C3 H3A 0.9300 . ?
C3 H3B 0.9300 . ?
C4 C5 1.51(4) . ?
C4 N1 1.54(4) . ?
C4 H4A 0.9700 . ?
C4 H4B 0.9700 . ?
C5 H5A 0.9600 . ?
C5 H5B 0.9600 . ?
C5 H5C 0.9600 . ?
C6 C7 1.50(3) . ?
C6 N1 1.54(3) . ?
C6 H6A 0.9700 . ?
C6 H6B 0.9700 . ?
C7 H7A 0.9600 . ?
C7 H7B 0.9600 . ?
C7 H7C 0.9600 . ?
C8 C9 1.46(5) . ?
C8 N1 1.50(3) . ?
C8 H8A 0.9700 . ?
C8 H8B 0.9700 . ?
C9 H9A 0.9600 . ?
C9 H9B 0.9600 . ?
C9 H9C 0.9600 . ?
C10 N1 1.47(4) . ?
C10 C11 1.49(5) . ?
C10 H10A 0.9700 . ?
C10 H10B 0.9700 . ?
C11 H11A 0.9600 . ?
C11 H11B 0.9600 . ?
C11 H11C 0.9600 . ?
C12 C13 1.51(5) . ?
C12 N2 1.52(5) . ?
C12 H12A 0.9700 . ?
C12 H12B 0.9700 . ?
C12A N2 1.47(6) . ?
C12A C13A 1.56(5) . ?
C12A H12C 0.9700 . ?
C12A H12D 0.9700 . ?
C13 H13A 0.9600 . ?
C13 H13B 0.9600 . ?
C13 H13C 0.9600 . ?
C13A H13D 0.9600 . ?
```

C13A H13E 0.9600 . ?
C13A H13F 0.9600 . ?
C14 C15 1.55(5) . ?
C14 N2 1.56(4) . ?
C14 H14A 0.9700 . ?
C14 H14B 0.9700 . ?
C14A N2 1.51(6) . ?
C14A C15A 1.54(5) . ?
C14A H14C 0.9700 . ?
C14A H14D 0.9700 . ?
C15 H15A 0.9600 . ?
C15 H15B 0.9600 . ?
C15 H15C 0.9600 . ?
C15A H15D 0.9600 . ?
C15A H15E 0.9600 . ?
C15A H15F 0.9600 . ?
N2 C12A 1.47(6) 5_666 ?
N2 C14A 1.51(6) 5_666 ?
N2 C12 1.52(5) 5_666 ?
N2 C14 1.56(4) 5_666 ?
O1 Si1 1.616(14) . ?
O1 W3 2.217(13) . ?
O1 W1 2.248(13) . ?
O2 W1 1.910(16) . ?
O2 W3 1.931(15) . ?
O3 W1 1.705(16) . ?
O4 W1 1.862(15) . ?
O4 W2 1.948(15) . ?
O5 W2 1.910(15) 2_656 ?
O5 W3 1.918(14) . ?
O6 W3 1.678(16) . ?
O7 Si1 1.616(15) . ?
O7 W5 2.306(14) 2_656 ?
O7 W4 2.315(14) . ?
O7 W2 2.372(15) . ?
O8 W1 1.887(15) . ?
O8 W4 1.945(15) . ?
O9 W2 1.709(16) . ?
O10 W2 1.917(15) . ?
O10 W4 1.934(16) . ?
O11 W2 1.911(15) . ?
O11 W5 1.957(16) 2_656 ?
O12 W3 1.871(15) . ?
O12 W5 1.948(15) . ?
O13 W5 1.860(16) . ?
O13 W4 1.931(16) . ?
O14 W4 1.689(15) . ?
O15 W4 1.909(15) . ?
O15 W5 1.917(15) 2_656 ?
O16 W5 1.675(15) . ?
O17 P1 1.554(16) . ?
O17 W1 1.983(15) . ?
O18 P1 1.542(17) . ?
O18 W3 2.015(16) . ?
O19 P1 1.51(2) . ?
Si1 O1 1.616(14) 2_656 ?
Si1 O7 1.616(15) 2_656 ?
W2 O5 1.910(15) 2_656 ?
W5 O15 1.917(15) 2_656 ?
W5 O11 1.957(16) 2_656 ?
W5 O7 2.306(14) 2_656 ?
C16 N3 1.164(19) . ?
C16 C17 1.551(19) . ?
C17 H17A 0.9600 . ?
C17 H17B 0.9600 . ?
C17 H17C 0.9600 . ?

```
loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 P1 112.0(17) . . ?
C2 C1 H1A 109.2 . . ?
P1 C1 H1A 109.2 . . ?
C2 C1 H1B 109.2 . . ?
P1 C1 H1B 109.2 . . ?
H1A C1 H1B 107.9 . . ?
C3 C2 C1 125(4) . . ?
C3 C2 H2 117.5 . . ?
C1 C2 H2 117.5 . . ?
C2 C3 H3A 120.0 . . ?
C2 C3 H3B 120.0 . . ?
H3A C3 H3B 120.0 . . ?
C5 C4 N1 114(2) . . ?
C5 C4 H4A 108.6 . . ?
N1 C4 H4A 108.6 . . ?
C5 C4 H4B 108.6 . . ?
N1 C4 H4B 108.6 . . ?
H4A C4 H4B 107.6 . . ?
C4 C5 H5A 109.5 . . ?
C4 C5 H5B 109.5 . . ?
H5A C5 H5B 109.5 . . ?
C4 C5 H5C 109.5 . . ?
H5A C5 H5C 109.5 . . ?
H5B C5 H5C 109.5 . . ?
C7 C6 N1 115(3) . . ?
C7 C6 H6A 108.6 . . ?
N1 C6 H6A 108.6 . . ?
C7 C6 H6B 108.6 . . ?
N1 C6 H6B 108.6 . . ?
H6A C6 H6B 107.6 . . ?
C6 C7 H7A 109.5 . . ?
C6 C7 H7B 109.5 . . ?
H7A C7 H7B 109.5 . . ?
C6 C7 H7C 109.5 . . ?
H7A C7 H7C 109.5 . . ?
H7B C7 H7C 109.5 . . ?
C9 C8 N1 117(3) . . ?
C9 C8 H8A 108.0 . . ?
N1 C8 H8A 108.0 . . ?
C9 C8 H8B 108.0 . . ?
N1 C8 H8B 108.0 . . ?
H8A C8 H8B 107.2 . . ?
C8 C9 H9A 109.5 . . ?
C8 C9 H9B 109.5 . . ?
H9A C9 H9B 109.5 . . ?
C8 C9 H9C 109.5 . . ?
H9A C9 H9C 109.5 . . ?
H9B C9 H9C 109.5 . . ?
N1 C10 C11 117(3) . . ?
N1 C10 H10A 107.9 . . ?
C11 C10 H10A 107.9 . . ?
N1 C10 H10B 107.9 . . ?
C11 C10 H10B 107.9 . . ?
H10A C10 H10B 107.2 . . ?
C10 C11 H11A 109.5 . . ?
C10 C11 H11B 109.5 . . ?
H11A C11 H11B 109.5 . . ?
```

```
C10 C11 H11C 109.5 . . ?
H11A C11 H11C 109.5 . . ?
H11B C11 H11C 109.5 . . ?
C13 C12 N2 112(4) . . ?
C13 C12 H12A 109.1 . . ?
N2 C12 H12A 109.1 . . ?
C13 C12 H12B 109.1 . . ?
N2 C12 H12B 109.1 . . ?
H12A C12 H12B 107.9 . . ?
N2 C12A C13A 121(5) . . ?
N2 C12A H12C 107.1 . . ?
C13A C12A H12C 107.1 . . ?
N2 C12A H12D 107.1 . . ?
C13A C12A H12D 107.1 . . ?
H12C C12A H12D 106.8 . . ?
C12 C13 H13A 109.5 . . ?
C12 C13 H13B 109.5 . . ?
H13A C13 H13B 109.5 . . ?
C12 C13 H13C 109.5 . . ?
H13A C13 H13C 109.5 . . ?
H13B C13 H13C 109.5 . . ?
C12A C13A H13D 109.5 . . ?
C12A C13A H13E 109.5 . . ?
H13D C13A H13E 109.5 . . ?
C12A C13A H13F 109.5 . . ?
H13D C13A H13F 109.5 . . ?
H13E C13A H13F 109.5 . . ?
C15 C14 N2 116(5) . . ?
C15 C14 H14A 108.3 . . ?
N2 C14 H14A 108.3 . . ?
C15 C14 H14B 108.3 . . ?
N2 C14 H14B 108.3 . . ?
H14A C14 H14B 107.4 . . ?
N2 C14A C15A 114(5) . . ?
N2 C14A H14C 108.8 . . ?
C15A C14A H14C 108.8 . . ?
N2 C14A H14D 108.8 . . ?
C15A C14A H14D 108.8 . . ?
H14C C14A H14D 107.7 . . ?
C14 C15 H15A 109.5 . . ?
C14 C15 H15B 109.5 . . ?
H15A C15 H15B 109.5 . . ?
C14 C15 H15C 109.5 . . ?
H15A C15 H15C 109.5 . . ?
H15B C15 H15C 109.5 . . ?
C14A C15A H15D 109.5 . . ?
C14A C15A H15E 109.5 . . ?
H15D C15A H15E 109.5 . . ?
C14A C15A H15F 109.5 . . ?
H15D C15A H15F 109.5 . . ?
H15E C15A H15F 109.5 . . ?
C10 N1 C8 106(3) . . ?
C10 N1 C4 117(3) . . ?
C8 N1 C4 109(2) . . ?
C10 N1 C6 109(3) . . ?
C8 N1 C6 108(3) . . ?
C4 N1 C6 107(2) . . ?
C12A N2 C12A 180(5) . 5_666 ?
C12A N2 C14A 119(3) . 5_666 ?
C12A N2 C14A 61(3) 5_666 5_666 ?
C12A N2 C14A 61(3) . . ?
C12A N2 C14A 119(3) 5_666 . ?
C14A N2 C14A 180(2) 5_666 . ?
C12A N2 C12 113(3) . 5_666 ?
C12A N2 C12 67(3) 5_666 5_666 ?
C14A N2 C12 110(4) 5_666 5_666 ?
```

```
C14A N2 C12 70(4) . 5_666 ?
C12A N2 C12 67(3) . . ?
C12A N2 C12 113(3) 5_666 . ?
C14A N2 C12 70(4) 5_666 . ?
C14A N2 C12 110(4) . . ?
C12 N2 C12 180(5) 5_666 . ?
C12A N2 C14 101(4) . . ?
C12A N2 C14 79(4) 5_666 . ?
C14A N2 C14 106(3) 5_666 . ?
C14A N2 C14 74(3) . . ?
C12 N2 C14 107(3) 5_666 . ?
C12 N2 C14 73(3) . . ?
C12A N2 C14 79(4) . 5_666 ?
C12A N2 C14 101(4) 5_666 5_666 ?
C14A N2 C14 74(3) 5_666 5_666 ?
C14A N2 C14 106(3) . 5_666 ?
C12 N2 C14 73(3) 5_666 5_666 ?
C12 N2 C14 107(3) . 5_666 ?
C14 N2 C14 180(4) . 5_666 ?
Si1 O1 W3 127.3(8) . . ?
Si1 O1 W1 127.1(7) . . ?
W3 O1 W1 94.3(5) . . ?
W1 O2 W3 116.8(7) . . ?
W1 O4 W2 143.8(8) . . ?
W2 O5 W3 141.4(8) 2_656 . ?
Si1 O7 W5 124.3(8) . 2_656 ?
Si1 O7 W4 125.7(8) . . ?
W5 O7 W4 92.4(5) 2_656 . ?
Si1 O7 W2 123.8(7) . . ?
W5 O7 W2 90.3(5) 2_656 . ?
W4 O7 W2 89.9(5) . . ?
W1 O8 W4 142.7(8) . . ?
W2 O10 W4 118.6(8) . . ?
W2 O11 W5 118.0(8) . 2_656 ?
W3 O12 W5 143.7(8) . . ?
W5 O13 W4 165.2(9) . . ?
W4 O15 W5 121.4(8) . 2_656 ?
P1 O17 W1 137.0(9) . . ?
P1 O18 W3 135.1(9) . . ?
O1 Si1 O1 116.1(11) . 2_656 ?
O1 Si1 O7 107.7(7) . . ?
O1 Si1 O7 108.1(7) 2_656 . ?
O1 Si1 O7 108.1(7) . 2_656 ?
O1 Si1 O7 107.7(7) 2_656 2_656 ?
O7 Si1 O7 109.1(11) . 2_656 ?
O19 P1 O18 113.2(12) . . ?
O19 P1 O17 113.9(12) . . ?
O18 P1 O17 109.4(9) . . ?
O19 P1 C1 105.9(12) . . ?
O18 P1 C1 107.0(11) . . ?
O17 P1 C1 106.9(11) . . ?
O3 W1 O4 102.4(8) . . ?
O3 W1 O8 99.6(8) . . ?
O4 W1 O8 89.9(6) . . ?
O3 W1 O2 97.5(7) . . ?
O4 W1 O2 159.3(6) . . ?
O8 W1 O2 92.6(7) . . ?
O3 W1 O17 96.5(8) . . ?
O4 W1 O17 87.3(6) . . ?
O8 W1 O17 163.8(6) . . ?
O2 W1 O17 84.6(7) . . ?
O3 W1 O1 170.3(7) . . ?
O4 W1 O1 85.3(6) . . ?
O8 W1 O1 86.1(6) . . ?
O2 W1 O1 74.3(6) . . ?
O17 W1 O1 77.8(6) . . ?
```

O9 W2 O5 102.4(7) . 2_656 ?
O9 W2 O11 100.6(7) . . ?
O5 W2 O11 89.0(6) 2_656 . ?
O9 W2 O10 100.6(7) . . ?
O5 W2 O10 156.5(6) 2_656 . ?
O11 W2 O10 82.2(6) . . ?
O9 W2 O4 102.8(7) . . ?
O5 W2 O4 92.9(6) 2_656 . ?
O11 W2 O4 155.6(6) . . ?
O10 W2 O4 86.6(6) . . ?
O9 W2 O7 174.3(6) . . ?
O5 W2 O7 81.7(5) 2_656 . ?
O11 W2 O7 75.3(6) . . ?
O10 W2 O7 75.1(6) . . ?
O4 W2 O7 80.9(5) . . ?
O6 W3 O12 100.0(7) . . ?
O6 W3 O5 100.8(7) . . ?
O12 W3 O5 90.4(6) . . ?
O6 W3 O2 98.8(7) . . ?
O12 W3 O2 91.4(7) . . ?
O5 W3 O2 159.8(6) . . ?
O6 W3 O18 95.9(7) . . ?
O12 W3 O18 164.1(6) . . ?
O5 W3 O18 88.0(6) . . ?
O2 W3 O18 84.8(7) . . ?
O6 W3 O1 171.6(6) . . ?
O12 W3 O1 85.5(6) . . ?
O5 W3 O1 85.4(5) . . ?
O2 W3 O1 74.6(6) . . ?
O18 W3 O1 78.6(6) . . ?
O14 W4 O15 101.9(7) . . ?
O14 W4 O13 103.2(7) . . ?
O15 W4 O13 93.0(6) . . ?
O14 W4 O10 99.9(7) . . ?
O15 W4 O10 88.0(6) . . ?
O13 W4 O10 156.1(6) . . ?
O14 W4 O8 101.0(7) . . ?
O15 W4 O8 156.6(6) . . ?
O13 W4 O8 86.5(6) . . ?
O10 W4 O8 83.3(6) . . ?
O14 W4 O7 173.4(7) . . ?
O15 W4 O7 72.8(6) . . ?
O13 W4 O7 81.4(6) . . ?
O10 W4 O7 76.2(6) . . ?
O8 W4 O7 84.0(5) . . ?
O16 W5 O13 102.9(7) . . ?
O16 W5 O15 102.5(7) . 2_656 ?
O13 W5 O15 93.2(6) . 2_656 ?
O16 W5 O12 100.4(7) . . ?
O13 W5 O12 88.2(6) . . ?
O15 W5 O12 156.2(6) 2_656 . ?
O16 W5 O11 98.9(7) . 2_656 ?
O13 W5 O11 157.5(6) . 2_656 ?
O15 W5 O11 87.3(6) 2_656 2_656 ?
O12 W5 O11 82.6(6) . 2_656 ?
O16 W5 O7 173.1(6) . 2_656 ?
O13 W5 O7 82.6(6) . 2_656 ?
O15 W5 O7 72.8(6) 2_656 2_656 ?
O12 W5 O7 83.8(5) . 2_656 ?
O11 W5 O7 76.1(6) 2_656 2_656 ?
N3 C16 C17 163(8) . . ?
C16 C17 H17A 109.5 . . ?
C16 C17 H17B 109.5 . . ?
H17A C17 H17B 109.5 . . ?
C16 C17 H17C 109.5 . . ?
H17A C17 H17C 109.5 . . ?

```
H17B C17 H17C 109.5 . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
P1 C1 C2 C3 -116(4) . . . . ?
C11 C10 N1 C8 -70(4) . . . . ?
C11 C10 N1 C4 51(4) . . . . ?
C11 C10 N1 C6 173(3) . . . . ?
C9 C8 N1 C10 -177(3) . . . . ?
C9 C8 N1 C4 57(4) . . . . ?
C9 C8 N1 C6 -59(4) . . . . ?
C5 C4 N1 C10 51(4) . . . . ?
C5 C4 N1 C8 171(3) . . . . ?
C5 C4 N1 C6 -72(4) . . . . ?
C7 C6 N1 C10 61(4) . . . . ?
C7 C6 N1 C8 -54(4) . . . . ?
C7 C6 N1 C4 -172(3) . . . . ?
C13A C12A N2 C12A 0(100) . . . 5_666 ?
C13A C12A N2 C14A -48(8) . . . 5_666 ?
C13A C12A N2 C14A 132(8) . . . . ?
C13A C12A N2 C12 -178(6) . . . 5_666 ?
C13A C12A N2 C12 2(6) . . . . ?
C13A C12A N2 C14 67(7) . . . . ?
C13A C12A N2 C14 -113(7) . . . 5_666 ?
C15A C14A N2 C12A -118(7) . . . . ?
C15A C14A N2 C12A 62(7) . . . 5_666 ?
C15A C14A N2 C14A 20(8) . . . 5_666 ?
C15A C14A N2 C12 110(6) . . . 5_666 ?
C15A C14A N2 C12 -70(6) . . . . ?
C15A C14A N2 C14 -5(6) . . . . ?
C15A C14A N2 C14 175(6) . . . 5_666 ?
C13 C12 N2 C12A -20(6) . . . . ?
C13 C12 N2 C12A 160(6) . . . 5_666 ?
C13 C12 N2 C14A 114(6) . . . 5_666 ?
C13 C12 N2 C14A -66(6) . . . . ?
C13 C12 N2 C12 0(12) . . . 5_666 ?
C13 C12 N2 C14 -131(7) . . . . ?
C13 C12 N2 C14 49(7) . . . 5_666 ?
C15 C14 N2 C12A 76(5) . . . . ?
C15 C14 N2 C12A -104(5) . . . 5_666 ?
C15 C14 N2 C14A -160(5) . . . 5_666 ?
C15 C14 N2 C14A 20(5) . . . . ?
C15 C14 N2 C12 -43(6) . . . 5_666 ?
C15 C14 N2 C12 137(6) . . . . ?
C15 C14 N2 C14 0(100) . . . 5_666 ?
W3 O1 Si1 O1 -112.4(10) . . . 2_656 ?
W1 O1 Si1 O1 113.8(10) . . . 2_656 ?
W3 O1 Si1 O7 126.3(9) . . . . ?
W1 O1 Si1 O7 -7.4(12) . . . . ?
W3 O1 Si1 O7 8.6(12) . . . 2_656 ?
W1 O1 Si1 O7 -125.2(9) . . . 2_656 ?
W5 O7 Si1 O1 -179.0(8) 2_656 . . . ?
W4 O7 Si1 O1 -55.3(11) . . . . ?
W2 O7 Si1 O1 63.4(10) . . . . ?
W5 O7 Si1 O1 54.9(11) 2_656 . . 2_656 ?
W4 O7 Si1 O1 178.6(8) . . . 2_656 ?
W2 O7 Si1 O1 -62.8(10) . . . 2_656 ?
```

```
W5 O7 Si1 O7 -61.9(7) 2_656 . . 2_656 ?
W4 O7 Si1 O7 61.8(7) . . . 2_656 ?
W2 O7 Si1 O7 -179.6(11) . . . 2_656 ?
W3 O18 P1 O19 -131.3(16) . . . . ?
W3 O18 P1 O17 -3.1(18) . . . . ?
W3 O18 P1 C1 112.3(15) . . . . ?
W1 O17 P1 O19 131.9(16) . . . . ?
W1 O17 P1 O18 4.1(18) . . . . ?
W1 O17 P1 C1 -111.4(16) . . . . ?
C2 C1 P1 O19 -177(2) . . . . ?
C2 C1 P1 O18 -55(3) . . . . ?
C2 C1 P1 O17 62(3) . . . . ?
W2 O4 W1 O3 -114.4(14) . . . . ?
W2 O4 W1 O8 -14.6(14) . . . . ?
W2 O4 W1 O2 82(2) . . . . ?
W2 O4 W1 O17 149.5(14) . . . . ?
W2 O4 W1 O1 71.5(13) . . . . ?
W4 O8 W1 O3 127.5(14) . . . . ?
W4 O8 W1 O4 24.9(14) . . . . ?
W4 O8 W1 O2 -134.5(14) . . . . ?
W4 O8 W1 O17 -55(3) . . . . ?
W4 O8 W1 O1 -60.4(14) . . . . ?
W3 O2 W1 O3 -173.5(10) . . . . ?
W3 O2 W1 O4 -10(2) . . . . ?
W3 O2 W1 O8 86.4(9) . . . . ?
W3 O2 W1 O17 -77.6(9) . . . . ?
W3 O2 W1 O1 1.2(8) . . . . ?
P1 O17 W1 O3 125.8(16) . . . . ?
P1 O17 W1 O4 -132.0(16) . . . . ?
P1 O17 W1 O8 -52(3) . . . . ?
P1 O17 W1 O2 28.8(15) . . . . ?
P1 O17 W1 O1 -46.2(15) . . . . ?
Si1 O1 W1 O3 176(4) . . . . ?
W3 O1 W1 O3 32(5) . . . . ?
Si1 O1 W1 O4 -40.1(10) . . . . ?
W3 O1 W1 O4 175.1(6) . . . . ?
Si1 O1 W1 O8 50.1(10) . . . . ?
W3 O1 W1 O8 -94.7(6) . . . . ?
Si1 O1 W1 O2 143.9(11) . . . . ?
W3 O1 W1 O2 -0.9(6) . . . . ?
Si1 O1 W1 O17 -128.3(11) . . . . ?
W3 O1 W1 O17 86.9(6) . . . . ?
W5 O11 W2 O9 179.2(8) 2_656 . . . ?
W5 O11 W2 O5 76.8(8) 2_656 . . 2_656 ?
W5 O11 W2 O10 -81.4(8) 2_656 . . . ?
W5 O11 W2 O4 -18.0(19) 2_656 . . . ?
W5 O11 W2 O7 -4.9(7) 2_656 . . . ?
W4 O10 W2 O9 -179.5(9) . . . . ?
W4 O10 W2 O5 12(2) . . . 2_656 ?
W4 O10 W2 O11 81.1(9) . . . . ?
W4 O10 W2 O4 -77.1(8) . . . . ?
W4 O10 W2 O7 4.3(7) . . . . ?
W1 O4 W2 O9 137.3(14) . . . . ?
W1 O4 W2 O5 -119.3(14) . . . 2_656 ?
W1 O4 W2 O11 -25(2) . . . . ?
W1 O4 W2 O10 37.2(14) . . . . ?
W1 O4 W2 O7 -38.2(13) . . . . ?
Si1 O7 W2 O9 -179(100) . . . . ?
W5 O7 W2 O9 48(6) 2_656 . . . ?
W4 O7 W2 O9 -44(7) . . . . ?
Si1 O7 W2 O5 45.5(9) . . . 2_656 ?
W5 O7 W2 O5 -87.5(6) 2_656 . . 2_656 ?
W4 O7 W2 O5 -179.9(6) . . . 2_656 ?
Si1 O7 W2 O11 136.6(10) . . . . ?
W5 O7 W2 O11 3.6(5) 2_656 . . . ?
W4 O7 W2 O11 -88.8(6) . . . . ?
```

```
Si1 O7 W2 O10 -137.7(10) . . . . ?
W5 O7 W2 O10 89.3(6) 2_656 . . . ?
W4 O7 W2 O10 -3.1(5) . . . . ?
Si1 O7 W2 O4 -48.8(9) . . . . ?
W5 O7 W2 O4 178.2(6) 2_656 . . . ?
W4 O7 W2 O4 85.8(6) . . . . ?
W5 O12 W3 O6 -126.6(15) . . . . ?
W5 O12 W3 O5 -25.6(15) . . . . ?
W5 O12 W3 O2 134.3(15) . . . . ?
W5 O12 W3 O18 58(3) . . . . ?
W5 O12 W3 O1 59.8(15) . . . . ?
W2 O5 W3 O6 111.9(13) 2_656 . . . ?
W2 O5 W3 O12 11.6(13) 2_656 . . . ?
W2 O5 W3 O2 -84(2) 2_656 . . . ?
W2 O5 W3 O18 -152.5(13) 2_656 . . . ?
W2 O5 W3 O1 -73.8(12) 2_656 . . . ?
W1 O2 W3 O6 173.6(9) . . . . ?
W1 O2 W3 O12 -86.1(9) . . . . ?
W1 O2 W3 O5 9(2) . . . . ?
W1 O2 W3 O18 78.4(9) . . . . ?
W1 O2 W3 O1 -1.2(8) . . . . ?
P1 O18 W3 O6 -128.1(15) . . . . ?
P1 O18 W3 O12 47(3) . . . . ?
P1 O18 W3 O5 131.3(15) . . . . ?
P1 O18 W3 O2 -29.8(14) . . . . ?
P1 O18 W3 O1 45.5(14) . . . . ?
Si1 O1 W3 O6 178(4) . . . . ?
W1 O1 W3 O6 -37(5) . . . . ?
Si1 O1 W3 O12 -51.1(10) . . . . ?
W1 O1 W3 O12 93.6(6) . . . . ?
Si1 O1 W3 O5 39.7(10) . . . . ?
W1 O1 W3 O5 -175.6(6) . . . . ?
Si1 O1 W3 O2 -143.8(11) . . . . ?
W1 O1 W3 O2 0.9(6) . . . . ?
Si1 O1 W3 O18 128.5(11) . . . . ?
W1 O1 W3 O18 -86.8(6) . . . . ?
W5 O15 W4 O14 168.7(9) 2_656 . . . ?
W5 O15 W4 O13 -87.2(9) 2_656 . . . ?
W5 O15 W4 O10 69.0(9) 2_656 . . . ?
W5 O15 W4 O8 1(2) 2_656 . . . ?
W5 O15 W4 O7 -7.2(8) 2_656 . . . ?
W5 O13 W4 O14 -151(3) . . . . ?
W5 O13 W4 O15 106(3) . . . . ?
W5 O13 W4 O10 14(5) . . . . ?
W5 O13 W4 O8 -50(3) . . . . ?
W5 O13 W4 O7 34(3) . . . . ?
W2 O10 W4 O14 -178.9(9) . . . . ?
W2 O10 W4 O15 -77.1(9) . . . . ?
W2 O10 W4 O13 16(2) . . . . ?
W2 O10 W4 O8 81.1(8) . . . . ?
W2 O10 W4 O7 -4.4(7) . . . . ?
W1 O8 W4 O14 -150.8(14) . . . . ?
W1 O8 W4 O15 17(3) . . . . ?
W1 O8 W4 O13 106.5(14) . . . . ?
W1 O8 W4 O10 -52.0(14) . . . . ?
W1 O8 W4 O7 24.8(14) . . . . ?
Si1 O7 W4 O14 -169(5) . . . . ?
W5 O7 W4 O14 -33(5) 2_656 . . . ?
W2 O7 W4 O14 58(5) . . . . ?
Si1 O7 W4 O15 -131.5(11) . . . . ?
W5 O7 W4 O15 5.1(6) 2_656 . . . ?
W2 O7 W4 O15 95.4(6) . . . . ?
Si1 O7 W4 O13 -35.6(9) . . . . ?
W5 O7 W4 O13 100.9(6) 2_656 . . . ?
W2 O7 W4 O13 -168.8(6) . . . . ?
Si1 O7 W4 O10 136.3(10) . . . . ?
```

```
W5 O7 W4 O10 -87.2(6) 2_656 . . . ?
W2 O7 W4 O10 3.1(5) . . . . ?
Si1 O7 W4 O8 51.7(10) . . . . ?
W5 O7 W4 O8 -171.7(6) 2_656 . . . ?
W2 O7 W4 O8 -81.4(6) . . . . ?
W4 O13 W5 O16 149(3) . . . . ?
W4 O13 W5 O15 -107(3) . . . 2_656 ?
W4 O13 W5 O12 49(3) . . . . ?
W4 O13 W5 O11 -17(5) . . . 2_656 ?
W4 O13 W5 O7 -35(3) . . . 2_656 ?
W3 O12 W5 O16 151.3(15) . . . . ?
W3 O12 W5 O13 -105.9(15) . . . . ?
W3 O12 W5 O15 -12(3) . . . 2_656 ?
W3 O12 W5 O11 53.5(15) . . . 2_656 ?
W3 O12 W5 O7 -23.2(14) . . . 2_656 ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.947
_diffrn_reflns_theta_full              70.00
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.947
_refine_diff_density_max    2.786
_refine_diff_density_min   -3.645
_refine_diff_density_rms    0.414
```